
Physique générale : quantique, Série 13

Assistants et tuteurs :

elena.acinapura@epfl.ch
 sara.alvesdossantos@epfl.ch
 felice.bordereau@epfl.ch

jeanne.bourgeois@epfl.ch
 sofia.brizigotti@epfl.ch
 thomas.chetaille@epfl.ch
 marco.dimambro@epfl.ch

leo.goutte@epfl.ch
 douaa.salah@epfl.ch
 arianna.vigano@epfl.ch

Exercice 1 : La liaison ionique

Dans la molécule de iodure de potassium, KI, les atome K et I se lie avec une liaison ionique où un électron est transféré de l'atome K à l'atome I. L'énergie de ionisation du potassium est de 4.34 eV, et l'affinité électronique du iodé est de 3.06 eV.

1. Quelle est l'énergie E_a nécessaire pour transférer un électron de K à I, de manière à former les ions K^+ et I^- ? Cette énergie s'appelle *énergie d'activation*.
2. Un modèle très utilisé pour le potentiel associé à la liaison entre deux atomes est le potentiel de Lennard-Jones

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] + E_a,$$

où r est la distance entre les deux noyaux et ϵ et σ sont des paramètres ajustable, qui caractérise la liaison pour chaque type spécifique de molécule. La distance d'équilibre des deux atomes qui forment la molécule est $r = r_0 = 0.305$ nm. L'énergie de dissociation de la molécule de KI est de 3.37 eV. Calculer les valeurs de σ et ϵ pour la molécule de KI.

3. Calculer la force nécessaire pour dissocier la molécule de KI.
4. Calculer la constante de force élastique pour des petites oscillations de la molécule autour de la distance d'équilibre $r = r_0$. Pour ce faire, effectuer une expansion limite de $U(r)$ autour de $r = r_0$.

Exercice 2 : La molécule d'eau

La molécule d'eau H_2O possède un moment d'inertie $I \simeq 2 \times 10^{-47} \text{ kg} \cdot \text{m}^2$.

1. Calculer la fréquence angulaire ω associée à un quantum de rotation de la molécule.
2. Quel est en moyenne le nombre de quanta de rotation que chaque molécule d'eau possède, à la température ambiante $T = 300$ K?
3. Calculer la vitesse moyenne de déplacement des atomes d'hydrogène (à la fois pour un seul quantum de rotation et pour la température ambiante), sachant que la molécule d'eau a un diamètre de 0.27 nm.

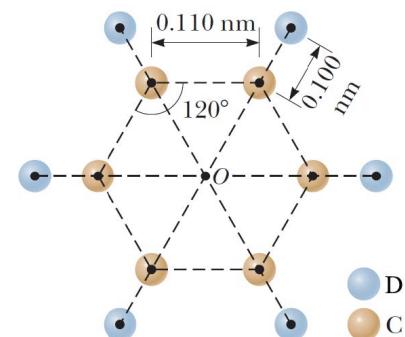
Exercice 3 : La molécule de CO

On considère la molécule de CO. La fréquence de la transition entre les niveaux de vibration avec numéros quantiques de vibration $v = 0$ et $v = 1$ est $\nu = 6.42 \times 10^{13}$ Hz.

1. On néglige le changement du numéro quantique de rotation dans cette transition, c.-à-d. on suppose que la transition se produit avec changement de numéro quantique de rotation $\Delta j = 0$. Calculer l'amplitude maximale A de la vibration de point zéro de la molécule, c.-à-d. celle dans l'état $v = 0$. La longueur de la liaison entre les deux atomes est de 0.113 nm. De combien (en pourcent) change donc cette longueur lors de la vibration ?
2. Calculer comment l'amplitude A change pour des états avec v plus élevé.
3. L'énergie de dissociation de la molécule de CO (c.-à-d. l'énergie nécessaire pour rompre la liaison moléculaire entre C et O) est de 11.6 eV. Si on suppose que la vibration de la molécule est parfaitement harmonique, calculer quel est le numéro quantique de vibration nécessaire pour que la vibration ait une énergie supérieure à l'énergie de dissociation.
4. Calculer l'amplitude A que la vibration aurait dans le point précédent. Discuter la validité de l'hypothèse harmonique à la lumière de ce résultat.

Exercice 4 : Question de type examen

On considère une molécule de benzène où les 6 atomes de hydrogène ont été remplacés par des isotopes de deutérium. Tous les atomes se trouvent sur le même plan, et les atomes de carbone, ainsi que ceux de deutérium, forment un hexagone (voir figure). Les masses des deux atomes sont $m_D = 3.34 \times 10^{-27}$ kg et $m_C = 1.99 \times 10^{-26}$ kg. On considère la rotation de la molécule autour de l'axe perpendiculaire à la feuille, passant par le centre O . Quelle sont les énergies rotationnelles autour de cet axe ? Ici $j = 0, 1, 2, 3, \dots$



- (A) $(1.49 \times 10^{-5}$ eV) j (C) $(1.49 \times 10^{-3}$ eV) $j(j + 1)$
(B) $(1.49 \times 10^{-5}$ eV) $j(j + 1)$ (D) $(1.49 \times 10^{-3}$ eV) $\frac{j}{j + 1}$

Exercice 5 : Question de type examen

Dans les molécules diatomiques, l'énergie de liaison en fonction de la distance entre les deux noyaux est bien décrite par le potentiel de Lennard-Jones

$$U(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}.$$

Considérons une molécule diatomique faite de deux fois le même atome de masse m . En faisant l'hypothèse que la vibration de la molécule est harmonique, calculer la fréquence de vibration ω .

Ⓐ $\omega = \sqrt{\frac{14.29 B^{7/3} A^{4/3}}{m}}$

Ⓑ $\omega = \sqrt{\frac{14.29 B^{7/3} A^{-4/3}}{m/2}}$

Ⓒ $\omega = \sqrt{\frac{14.29 B^{4/3} A^{-7/3}}{m/2}}$

Ⓓ $\omega = \sqrt{\frac{14.29 B^{7/3} A^{-4/3}}{m}}$